



TITLE:

# ソフトコアモデルの固相-液相転移 (Bethe格子,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

桂, 重俊

---

CITATION:

桂, 重俊. ソフトコアモデルの固相-液相転移(Bethe格子,基研研究会報告). 物性研究 1974, 23(1): A9-A13

ISSUE DATE:

1974-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88866>

RIGHT:

$m(T)$ ,  $\chi(T)$  が通常の 1 スピン当りの自発磁化および帯磁率に当り, 表 1 に示すように, (iii) の温度領域では Stanley-Kaplan 型の磁氣的相になっている。

$m(T)$  が常に 0 であるのは, Bethe 格子が reducible であることにより,  $\chi(T)$  が低温で発散するのは, 各格子点の  $m$  番目の近接格子点数が,  $m$  と共に指数関数的に増大することに負っている。3 次元空間の現実の物質でこのような相が生ずるかどうかはよく判らないが, 例えば random なスピン系などで, 相互作用をもつスピン同志のつながりが reducible lattice に近いような場合には, 低温まで自発磁化の発生が押えられ, 大きい帯磁率をもつ場合があるかも知れない。

本報告のくわしい結果は Prog. Theor. Phys. 51 (1974), 1053 にある。

## ソフトコアモデルの固相-液相転移

東北大工 桂 重 俊

研究会では 1) 第 2 近接相互作用を有する Beth 格子, 2) ソフトコアモデルの固相-液相転移, 3) ランダムな Bethe 格子, について述べたが 1) は ref. 1 に 3) は ref. 2 に発表したので本稿では研究会でのべたときの訂正を含めて 2) について書いておく。

格子気体のモデルを考え同じ site には 1 個の分子しか入ることが出来ず, 1st neighbor の相互作用を  $-2J$  としたモデル ( $H = -2J \sum_{nn} \nu_i \nu_j$ ,  $\nu_i = 0, 1$ ,  $J < 0$  で引力) を考える。このモデルを Bethe 近似 (無限に大きい Bethe 格子の厳密解) で扱うには ref. 1 の磁性体の磁場磁化特性を格子気体の圧力体積特性にやきなおせばよい。disordered state (液相) と ordered state (固相) との存在の可能性を考える。

$$x = e^{-J/kT},$$

$$x \ell_{\alpha, \beta} = u_{\alpha, \beta}, \quad z \equiv x^q y = \text{fugacity}$$

桂 重俊

とすると  $\alpha$ -sublattice,  $\beta$ -sublattice の密度  $\rho_\alpha$ ,  $\rho_\beta$  は (I.3.4) により

$$\rho_\alpha = \frac{z (1 + u_\beta x^2)^q}{(1 + u_\beta)^q + z (1 + u_\beta x^2)^q} \quad (= \frac{1 - \sigma_\alpha}{2}) \quad (1a)$$

$$\rho_\beta = \frac{z (1 + u_\alpha x^2)^q}{(1 + u_\alpha)^q + z (1 + u_\alpha x^2)^q} \quad (1b)$$

となる。

$q$  は coordination number である。  $u_\alpha$ ,  $u_\beta$  は

$$u_\alpha = z \left( \frac{1 + u_\beta x^2}{1 + u_\beta} \right)^{q-1}, \quad u_\beta = z \left( \frac{1 + u_\alpha x^2}{1 + u_\alpha} \right)^{q-1} \quad (2)$$

をみたすように定まる (I.3.2)。明に  $u_\alpha = u_\beta = u$  の解があり, これが disordered state である。(2) の  $u_\alpha \neq u_\beta$  の解が ordered state を与える。

disordered state では (2) より  $u_\alpha = u_\beta$  とおき

$$z = u \left( \frac{1 + u}{1 + u x^2} \right)^{q-1}$$

を (1) で  $u_\alpha = u_\beta = u$  とおいたものに入れると,

$$\rho = \frac{u + u^2/x^2}{1 + 2u + u^2/x^2} \quad (3)$$

圧力  $P$  は

$$\frac{P}{kT} = \int_0^u \rho \frac{d \log z}{du} du \quad (4)$$

積分を行った後 (3) より  $u$  を  $\rho$  で表し, これを (4) の結果に入れると

$$\frac{P}{kT} \equiv S_1(\rho) = (q-1) \log (1-\rho)$$

$$- \frac{q}{2} \log \frac{(1-2\rho) - 2x^{-2}(1-\rho) + \sqrt{(1-2\rho)^2 + 4x^{-2}\rho(1-\rho)}}{2(1-x^{-2})} \quad (5)$$

これは quasi-chemical approximation によって得られる状態式<sup>3)</sup>と等価である。  
 $x \rightarrow \infty$  で Burley の hard core lattice gas (1st neighbor infinite repulsion) の disordered state の状態式<sup>4)</sup>に一致する。

次に  $q=3$  の ordered state を考える。(2) の分母を払ったものを辺々引算して  $u_\alpha - u_\beta$  でわると

$$1 - u_\alpha u_\beta + \frac{2z}{x^2} + \frac{u_\alpha + u_\beta}{x^4} z = 0 \quad (6)$$

(6) に (2) の第2式を入れると  $u_\alpha$  を定める式として

$$\left(1 + \frac{z}{x^4}\right)^2 u_\alpha^2 + \left(-z + 2 + \frac{4z}{x^2} + \frac{z}{x^4} + \frac{2z^2}{x^6}\right) u_\alpha + \left(1 + \frac{z}{x^2}\right)^2 = 0 \quad (7)$$

を得る。この2根が  $u_\alpha, u_\beta$  を与える。(1a) に (2a) より求めた  $z$  を入れると

$$\rho = \frac{1}{2} (\rho_\alpha + \rho_\beta) = \frac{1}{2} \frac{u_\alpha + u_\beta + 2u_\alpha u_\beta / x^2}{1 + u_\alpha + u_\beta + u_\alpha u_\beta / x^2} \quad (8)$$

(7) の根と係数の関係を用いて  $\rho$  を  $u_\alpha, u_\beta$  の代りに  $z$  で表わすと

$$\rho = \frac{1}{2} \frac{2 - z(1 - 3x^{-2})}{1 - z(1 - 3x^{-2}) + x^{-6} z^2} \quad (9)$$

(9) より

$$z = \frac{4(1-\rho)}{(1-2\rho)(1-3x^{-2}) + \sqrt{(1-2\rho)^2(1-3x^{-2})^2 + 16x^{-6}\rho(1-\rho)}} \quad (10)$$

ordered state 圧力  $p$  は

$$\frac{p}{kT} = \left(\frac{p}{kT}\right)_c + \int_{z_c}^z \frac{\rho}{z} dz \quad (11)$$

で与えられる。 $z_c$  は ordered state と disordered state の交わる点の fugacity の値 ( の内の小さい方 ),  $(p/kT)_c$  はその点における disordered state の値である。

ordered state と disordered state の転移点は (7) が等根をもつ点であるから (7) の判別式を  $D$  とすると  $D=0$  より

$$\frac{z_{c1}}{z_{c2}} = \frac{8}{1-6x^{-2}-3x^{-4} \pm \sqrt{(1-6x^{-2}-3x^{-4})^2 - 64x^{-6}}} \quad (12)$$

(12) で  $z_{c1} = z_{c2}$  となる点が転移温度  $x_c$  を与える。 $(x_c=3, T/|J|=0.910239)$  故に ordered state の圧力  $p$  は (11)(5)(9)(12) より

$$\frac{p}{kT} = s_1(\rho_{c1}) + s_2(z(\rho)) - s_2(z_{c1}) \quad (13)$$

で与えられる。ここに

$$s_2(z) = -\frac{1}{2} \log \left| \frac{x^2}{x^2} + (3-x^2) \frac{1}{z} + x^{-4} \right| \quad (14)$$

となる。 $s_1(\rho_{c1})$  は (12) の  $z_{c1}$  の値を (9) に入れた  $\rho_{c1}$  の値に対する (5) の disordered state の  $p/kT$  の値,  $s_2(z(\rho))$  は (10) の  $z$  を (14) に入れたもの,  $s_2(z_{c1})$  は (12) の  $z_{c1}$  を (14) に入れたものである。hard core limit  $x \rightarrow \infty$  で Runnels<sup>5)</sup> の ordered state の状態式

$$p/kT = \log(1-\rho) - \frac{1}{2} \log(1-2\rho) + \log 2 \quad (15)$$

を再現する。

密度が ordered state の最大値  $\rho(z_{c2})$  をこえると再び disordered state にもどりその圧力  $p$  は (5) の  $s_1(\rho) [= s_1(\rho_{c1}) + s_2(z_{c2}) - s_2(z_{c1}) + s_1(\rho) - s_1(\rho_{c2})]$  で与えられる。

Fig.1 に圧力体積特性を示す。引力の場合の状態図も比較の為に示した。斥力のとき  $0 < T < T_c$  ( $x_c < x < \infty$ ) に於て 2 次の fluid-solid 転移がある。Fig.2 に転移点の  $p-T$  図を示す。融点極大の現象が見られる。引力のとき  $0 < T < T'_c$  ( $0 < x < x'_c$ ) で 1 次の gas-liquid 転移が存在する。気相 — 液相転移の臨界温度は

$x'_c = \frac{1}{3}$  で与えられる。

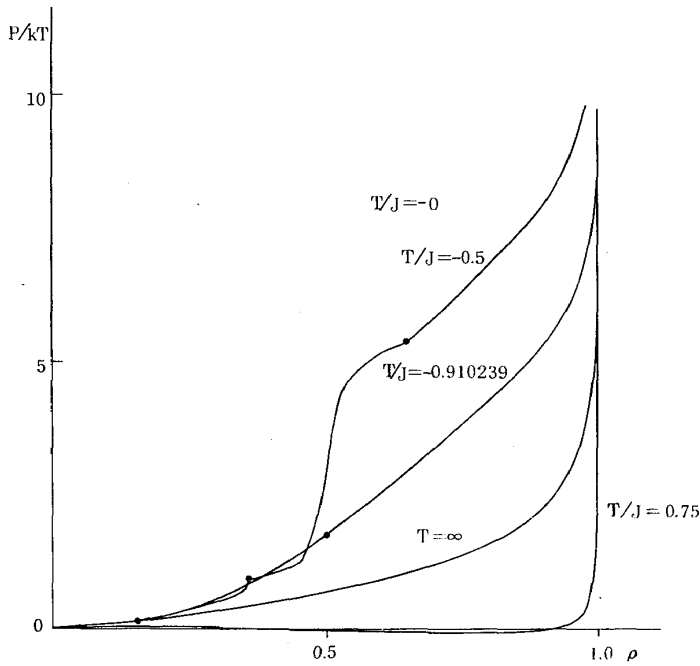


図 1

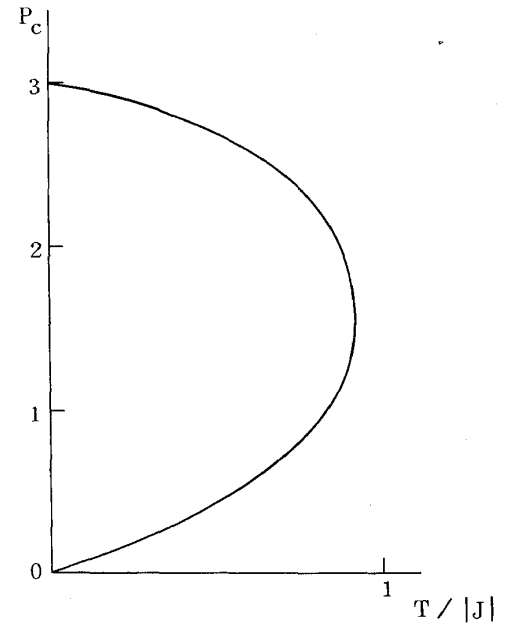


図 2

1st neighbor infinite repulsion の有限の Bethe 格子が表面効果により転移がなくなることは Runnels<sup>5)</sup> により論ぜられている。

#### Reference

- 1) S.Katsura and M.Takizawa, Prog. Theor. Phys. 51 82 (1974)
- 2) S.Katsura and F.Matsubara, Canad. J.Phys. 52 120 (1974)
- 3) F.Cernushi and H.Eyring, J.Chem. Phys. 7 547 (1939)
- 4) D.M.Burley, Proc. Phys. Soc. 75 262 (1960)
- 5) L.K.Runnels, J.Math. Phys. 8 2081 (1968)